Liaison chimique

I- Généralités

Les chapitres précédents ont fait l'objet de l'étude d'un atome considéré isolé. Mais en réalité, à l'exception des gaz rares, les atomes sont souvent associés sous forme de molécules ou d'ions dans des cristaux. L'association des atomes, forme de composés chimiques, est basée sur la théorie de la liaison chimique. Celle-ci, concernant principalement la structure électronique des molécules, doit répondre à de nombreuses questions :

- la raison pour laquelle les atomes réagissent entre eux,
- l'existence de H_2 et non pas H_3 par exemple,
- l'existence de l'hélium sous forme atomique He et non pas He_2,
- pourquoi la forme géométrique de CO_2 est linéaire alors que H_2O est coudée,
- pourquoi BF_3 est plane alors que NH_3 est pyramidale,

L'explication de ces faits est à rechercher dans le comportement des électrons échangés entre les atomes constituant la molécule. La répartition de ces électrons, dits électrons de valence, sur les orbitales moléculaires, constitue la structure électronique des molécules.

Il existe deux types de liaison chimique forte qui unissent les atomes : la liaison covalente et la liaison ionique.

I-1- La liaison covalente

La liaison covalente, très stable, est la mise en commun d'électrons d'énergies identiques ou voisines par deux atomes d'électronégativités assez proches.

On rencontre ce type de liaison dans des molécules telles que H_2, O_2, F_2, NH_3, …, les composés organiques et dans certains cristaux tel que le diamant.

I-1-1- Formation de la liaison chimique

Soit le cas le plus simple, la molécule H_2 où deux types d'interactions peuvent se manifester entre les 2 atomes d'hydrogène :

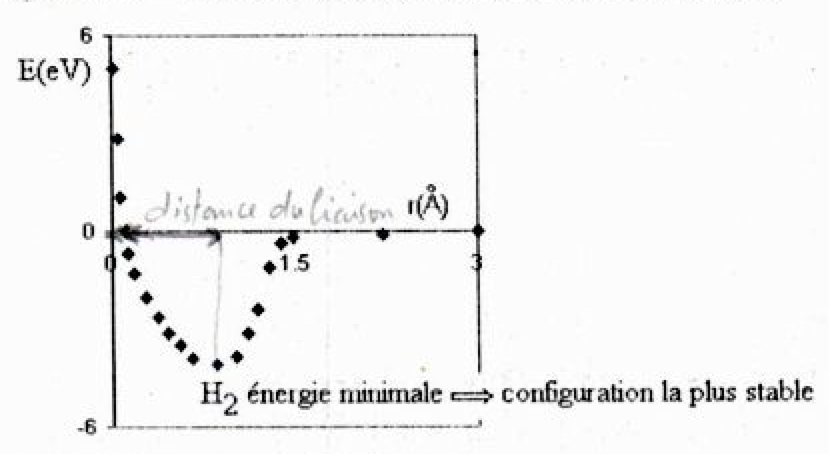
- la répulsion entre les nuages électroniques d'une part et entre leurs noyaux d'autre part,
- l'attraction entre le nuage électronique d'un atome et le noyau de l'autre .

Quand les deux atomes sont très loin l'un de l'autre, il n'y a pas de liaison entre eux. En se rapprochant, ils s'attirent mutuellement et fortement au fur et à mesure que la distance séparant leurs noyaux diminue : dans ce cas l'attraction l'emporte sur la répulsion. Quand cette distance devient très petite c'est la répulsion qui l'emporte. Ainsi, il doit exister une position d'équilibre où les deux effets se compensent et les nuages électroniques des deux



atomes se recouvrent. Si les électrons peuvent s' échanger entre les deux atomes, il y a stabilisation du système total et formation d'une liaison chimique. Plus le domaine de recouvrement est important, plus la liaison est forte: C'est le PRINCIPE DU RECOUVREMENT MAXIMUM.

La formation de la molécule H_2 est illustrée par la variation de l'énergie potentielle du système H—H en fonction de la distance entre leurs noyaux.



I-1-2- Diagramme de Lewis

C'est la représentation des électrons de valence par des points autour du symbole chimique de l'élément considéré :

H (z=1) : $1s^1$ H·

Li (z=3): $1s^2 2s^1$ Li·

N (z=7): $1s^2 2s^2 2p^3$:Ṅ·

F (z=9): $1s^2 2s^2 2p^5$:F̈·

Ainsi, Lewis a pu expliquer la liaison covalente par la mise en commun entre les 2 atomes liés d'une paire d'électrons formées par les 2 électrons provenant chacun d'un atome.

Exemple:

H + H → H:H : la paire d'électrons peut être représenter par un simple tiret tel que : H—H.

HF : H + F → H:F̈: ou H-F̄.

NH₃ : 3H + N → H-N̈-H (avec H en dessous) ou H-N̄-H (avec H en dessous).

F_2 : F + F → :F̈:F̈: ou F̄-F̄.

Dans certains cas, la paire d'électrons peut être fournie par l'un des 2 atomes ; c'est la liaison par covalence dative ou liaison de coordinence : A⁚ ⌷B ⟶ A−B



Exemple : $H\cdot + \cdot\overline{Cl}| \longrightarrow H-\overline{Cl}|$; $H^{+} + |NH_3 \longrightarrow [H-NH_3]^{+}$

Pour former une liaison de covalence il faut que les 2 atomes possèdent tous les 2 un électron libre ou l'un possède une paire d'électrons libre et l'autre une case vide. La paire ou doublet d'électrons assurant les liaisons sont dits liants. Ceux qui n'assurent pas de liaisons sont dits non-liants ou paire libre ou doublet n. Il peut aussi subsister des cases vides.

Exemple : $AlCl_3$ (case vide ; doublet libre ; doublet liant)

Dans certaines molécules, plus d'une paire d'électrons peuvent être mises en jeu dans la liaison entre 2 atomes :

- liaison double : $H_2C=CH_2$; $\langle O=C=O\rangle$; $\langle O=O\rangle$
- liaison triple : $H-C\equiv C-H$; $|N\equiv N|$; $H-C\equiv N|$.

I-1-3-Règle de l'octet

La règle de l'OCTET proposée par LEWIS fait appel aux électrons pour expliquer la liaison chimique : les atomes qui s'associent en molécules ont une configuration électronique stable formée de 2 (pour H) ou 8 électrons périphériques, par exemple l'azote dans NH_3. Mais il existe de très nombreuses exceptions : PCl_5 , SF_6 . PCl_5, SF_6, …

I-1-4- Rupture d'une liaison covalente

La rupture d'une liaison covalente peut se produire de manière que chacun des 2 atomes conserve l'un des électrons du doublet liant : c'est l'homolyse. Dans d'autre cas, l'un conserve le doublet liant et l'autre se retrouve avec une case vide : c'est l'heterolyse.

La rupture des liaisons peut se faire sous l'effet de la chaleur : c'est la thermolyse, ou sous l'effet de la lumière : c'est la photolyse.

II- La théorie ondulatoire de la liaison chimique

II- 1- Introduction

Le concept de Lewis, où la liaison covalente est la mise en jeu d'un doublet d'électrons entre 2 atomes liés, se trouve en défaut devant l'existence d'un certain nombre de composés chimiques n'obéissant pas à la règle de l'octet. Ce concept a été complété par la théorie ondulatoire de la liaison chimique. Celle-ci consiste en le recouvrement de 2 orbitales atomiques (OA) donnant naissance à une orbitale moléculaire (OM).

Comme dans le cas de l'atome isolé ; chaque électron d'une molécule est décrit par une fonction d'onde, dite OM, solution de l'équation de Schrödinger : $H\Phi=E\Phi$.



Le carré de cette fonction représente la densité de probabilité de l'OM.

A chaque OM est associé un niveau d'énergie plus faible que celles des 2 atomes séparés. La molécule est donc plus stable que les 2 atomes non liés.

Le peuplement des niveaux d'énergie d'une molécule suit les mêmes principes que ceux appliqués à un atome isolé (remplissage progressif des OM d'énergie croissante, le respect de la règle de Hund pour les niveaux de même énergie et le principe d'exclusion de Pauli).

Deux types de molécules diatomiques feront l'objet de cette théorie : molécules homonucléaires, où les 2 atomes sont identiques : type A_2 (H^+_2, H_2, F_2, N_2, O_2,...) et molécules hétéronucléaires : type AB (CO, NO, HF,...).

II- 2- Application de la théorie des OM aux molécules diatomiques(H_2^+)

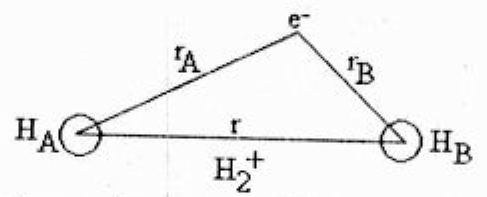
Pour la résolution de l'équation de Schrödinger d'une molécule, on utilise une approximation dite : combinaison linéaire des OA , CLOA. Cette méthode permet de traiter d'une façon relativement simple et rigoureuse le cas du plus simple, l'ion moléculaire H_2^+.

On considère, dans un premier temps, le système H_2^+ dans lequel les deux protons H_A et H_B sont éloignés à une distance r infinie. Le système peut alors être décrit par un atome d'hydrogène et un proton sans interaction entre eux. On a donc deux situations :

HA(e-)-------- H_B (atome A, proton B) H_A----------HB(e-) (proton A, atome B)

$\Psi_A = 1s_A = Ne^{(-r_A/a_0)}$ $\Psi_B = 1s_B = Ne^{(-r_B/a_0)}$

Quand l'atome d'hydrogène H est assez proche du proton H^+, il y a formation de l'ion monoélectronique H_2^+. Le nuage électronique est distribué de manière équitable sur les deux noyaux.



- Lorsque l'électron se trouve au voisinage du proton H_A, l'influence de H_B est négligeable alors l'électron est décrit sensiblement par l'OA Ψ_A.
- Lorsque l'électron se trouve au voisinage du proton H_B, l'influence de H_B est négligeable alors l'électron est décrit sensiblement par l'OA Ψ_B.

Par conséquent l'OM Φ, qui décrit le mouvement de l'électron est la combinaison linéaire des deux OA Ψ_A et Ψ_B: $\Phi = a_1\Psi_A + a_2\Psi_B$. a_1 et a_2 sont les coefficients de normalisation ou poids statistiques de Ψ_A et Ψ_B (ils représentent en quelque sorte le temps séjourné par l'électron au voisinage de chaque proton).

a_1^2 (respectivement a_2^2) indique la probabilité avec laquelle on peut dire que l'électron de l'ion H_2^+ soit décrit par Ψ_A (respectivement Ψ_B). Comme les deux noyaux sont identiques, alors : $a_1^2 = a_2^2 \Leftrightarrow a_1 = \pm a_2 \Rightarrow$ il en résulte deux combinaisons linéaires des deux OA Ψ_A et Ψ_B: $\Phi_1 = a(\Psi_A + \Psi_B)$ et $\Phi_2 = a'(\Psi_A - \Psi_B)$.

Soit à calculer les coefficients de normalisation de Φ_1 et Φ_2 :

Les OM Φ_1 et Φ_2 sont normées :

$\int_{esp}\Phi_1^2 dv = \int_{esp} a^2(\Psi_A + \Psi_B)^2 dv = 1 \Leftrightarrow a^2(\int_{esp}\Psi_A^2 dv + \int_{esp}\Psi_B^2 dv + 2\int_{esp}\Psi_A\Psi_B dv) = 1$;

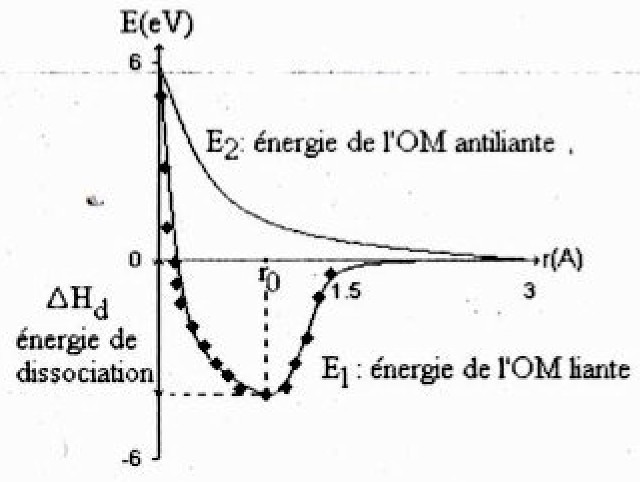
$s = \int_{esp}\Psi_A\Psi_B dv$: appelée intégrale de recouvrement. Elle dépend de la distance entre les 2 noyaux et prend de faibles valeurs. Comme les OA Ψ_A et Ψ_B sont également normées, alors :

$\int_{esp}\Psi_A^2 dv = \int_{esp}\Psi_B^2 dv = 1 \Rightarrow a^2(1 + 1 + 2s) = 1 \Leftrightarrow 2a^2(1 + s) = 1 \Leftrightarrow a^2 = 1/2(1 + s)$

$\Rightarrow a = 1/[2(1 + s)]^{1/2}$. La normalisation de Φ_2 conduit à : $a' = 1/[2(1 - s)]^{1/2}$.

Donc : $\Phi_1 = 1/[2(1 + s)]^{1/2} (\Psi_A + \Psi_B)$ et $\Phi_2 = 1/[2(1 - s)]^{1/2} (\Psi_A - \Psi_B)$

La résolution de l'équation de Schrödinger $H\Phi = E\Phi$, conduit au calcul de l'énergie associée à chacune des deux OM : $\Phi_1 \rightarrow E_1$ et $\Phi_2 \rightarrow E_2$. L'évolution de ces énergies en fonction de la distance internucléaire, r, est donnée par la courbe de potentielle moléculaire représentée sur la figure suivante.



E_1 ,nulle à l'infinie, s'abaisse lorsque r diminue pour passer par un minimum où l'ion H_2^+ est stable : $\Phi_1$est l'OM liante noté σ. Par contre, E_2 s'élève et déstabilise le système : Φ_2 est l'OM antiliante noté σ^*.

L'OM est dénommée σ car elle présente une symétrie de révolution (recouvrement axial) autour de l'axe joignant les deux noyaux. Les deux OM construites à partir d'OA de type s sont notées σ_s et σ^*_s.

II-2- 1- Diagramme énergétique des OM de H_2^+ :



La structure électronique des molécules est la disposition des électrons disponibles dans les OM d'énergie croissante. Ce qu'on peut, également, représenter par un diagramme énergétique, tel que:

1s ---- σ_{1s}^* ---- 1s

σ_{1s}

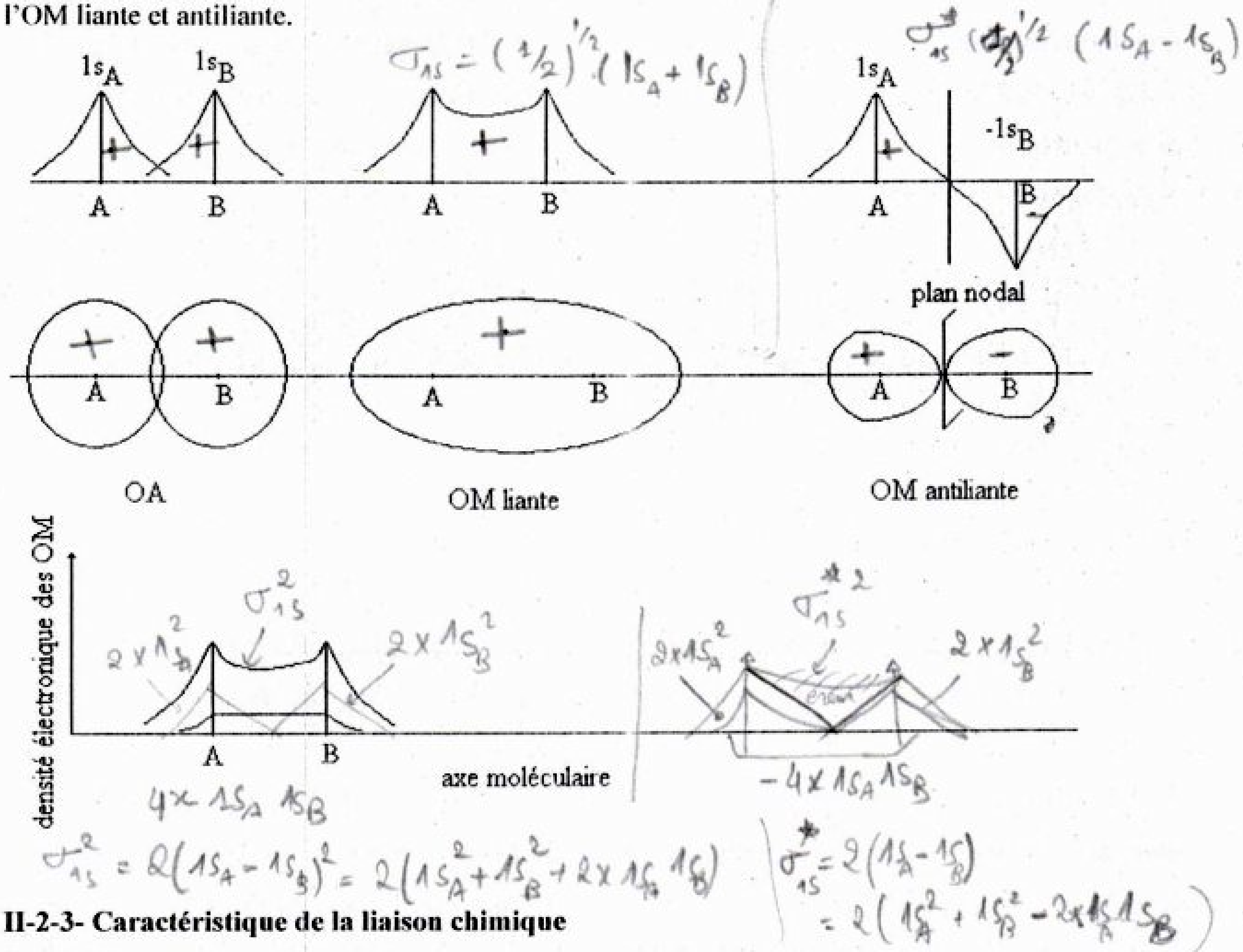
II-2- 2- Représentation des OM de H_2^+ :

Pour représenter graphiquement les OM de H_2^+ nous avons négligé la valeur assez faible de l'intégrale de recouvrement, s. Les fonctions d'onde σ_s et σ_s^* deviennent alors :

$\sigma_{1s} = (1/2)^{1/2}(1s_A + 1s_B)$ et $\sigma_{1s}^* = (1/2)^{1/2}(1s_A - 1s_B)$.

On remarque que $\sigma_s^* = 0$ pour $r_A = r_B$, celle-ci présente donc un plan nodal.

Du point de vue de la liaison chimique, c'est la représentation de la densité électronique qui est intéressante car, elle permet de comprendre l'origine physique de la formation de l'OM liante et antiliante.



II-2-3- Caractéristique de la liaison chimique

On définie pour chaque liaison chimique les grandeurs suivantes :

<u>a- nombre ou indice de liaison :i</u>

Par analogie avec le concept de Lewis, une liaison correspond à 2 électrons. On définit le nombre de liaison par : $i=1/2(n-n^*)$; où n présente le nombre d'électrons situés dans les OM liantes et n* celui des OM antiliantes. Un édifice moléculaire est d'autant plus stable que la différence (n-n*) est grand.

b- longueur d'une liaison :l

C'est la distance internucléaire d'équilibre. l est d'autant plus petit que i est grand.

c- Energie de dissociation :ΔH_d

C'est l'énergie qu'il faut fournir à la molécule à l état gazeux pour la dissocier en atomes gazeux. ΔH_d augmente avec l'indice de liaison.

d- Magnétisme.

Le comportement d'une substance(atome, molécule ou ion) placée dans un champ magnétique peut être : diamagnétique (les particules sont repoussées par ce champ) ou paramagnétique (attirées par ce champ).

Une particule paramagnétique est caractérisée par un moment magnétique :$\mu= [x(x+2)]^{1/2}\mu_B$.

x : le nombre d'électron célibataires ; μ_B magnéton de Bohr.

La mesure des moments magnétiques permet d'obtenir des informations expérimentales sur la structure électronique.

II-2-4- Exemples de molécules ou ion moléculaires (à partir de la 1ière période) :

a-H_2^+ :

-la structure électronique : $(\sigma_{1s})^1$

-le nombre de liaison : i=1/2

-longueur de liaison : l=1.06A

$H_2^+ \longrightarrow H^+ + H$: ΔH_d=256 kJ/mol

σ^*_{1s}
1s 1s
σ_{1s}

b-H_2 :

-la structure électronique : $(\sigma_{1s})^2$

-le nombre de liaison : i=1

-longueur de liaison : l=0.74A

ΔH_d=432 kJ/mol

On remarque que $l(H_2)<l(H_2^+)$ et $\Delta H_d(H_2)>\Delta H_d(H_2^+)$

σ^*_{1s}

1s ↿ .... ⇃ 1s

↿⇂

σ_{1s}

c-He_2^+ :

-la structure électronique : $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}*)^1$

-le nombre de liaison : i=1/2

-longueur de liaison : l=1.08A

ΔH_d=251 kJ/mol

↿

σ^*_{1s}

1s ↿ .... ⇂↿ 1s

↿⇂

σ_{1s}

c-He_2 :

-la structure électronique : $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}*)^2$

-le nombre de liaison : i=0

-longueur de liaison ?

ΔH_d ?

l'indice de liaison de l'He est nul donc la molécule He_2 n'existe pas.

II-2-5-Molécules diatomiques homonucléaires : Type A_2(à partir de la 2ème période) :

De la même façon dont on a combiné les OA 1s, on peut combiner également les OA 2s entre elles, 2p entre elles ainsi que parfois 2s avec 2p. On obtient une séquence d'OM d'énergie croissante. Nous allons traiter les molécules de type A_2 constituées des éléments de la 2ème période de la classification périodique. Ce sont les OA de valence qui interviennent dans la formation de la liaison chimique :

$A(2s_A, 2p_x, 2p_y, 2p_z)$ et $A'(2s_A, 2p_{x'}, 2p_{y'}, 2p_{z'})$

Seules les OA d'énergies peu différentes et ayant les mêmes éléments de symétrie qui peuvent se recouvrirent pour donner des OM. Il peut y avoir une combinaison s-s, p-p ou s-p (cette interaction peut avoir lieu dans le cas des atomes de z≤7).

a-les OM σ_z :

On obtient 2 OM, σ_{2s} et $\sigma_{2s}*$, par le recouvrement axial des 2 OA 2s :

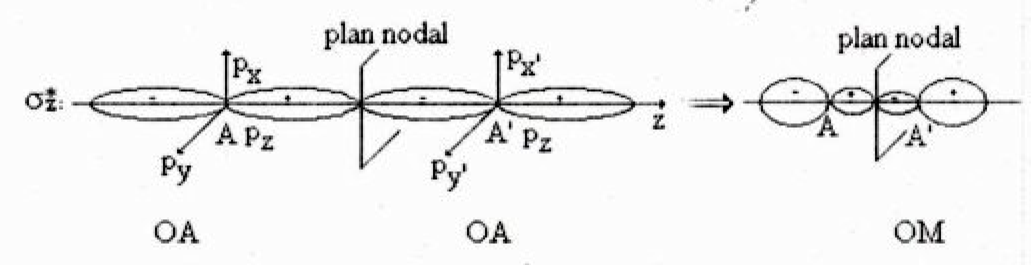
$\sigma_{2s}= (1/2)^{1/2}(2s_A+2s_{A'})$ et $\sigma_{2s}*= (1/2)^{1/2}(2s_A-1s_{A'})$.

Le recouvrement des 2 OA ($2p_z$ et $2p_{z'}$) se fait suivant l'axe des z et conduit à 2 OM :

$\sigma_z= (1/2)^{1/2}(2p_z-2p_{z'})$ liante et $\sigma_z*= (1/2)^{1/2}(2p_z+2p_{z'})$ antiliante.

σ_z: p_x $p_{x'}$ A p_z A' p_z p_y $p_{y'}$ z ⟹ A A'

OA OA OM



b-les OM σ_{s-pz} :

Le recouvrement axial n'est possible qu'entre les OA 2s et $2p_z$:

σ_{s-p_z}: x $p_{x'}$ y A A' p_z $p_{y'}$ z ⟹ A A' z

OA OA OM

plan nodal plan nodal

$\sigma^*_{s-p_z}$: x $p_{x'}$ y A A' p_z $p_{y'}$ z ⟹ A A' z

OA OA OM

c-les OM π:

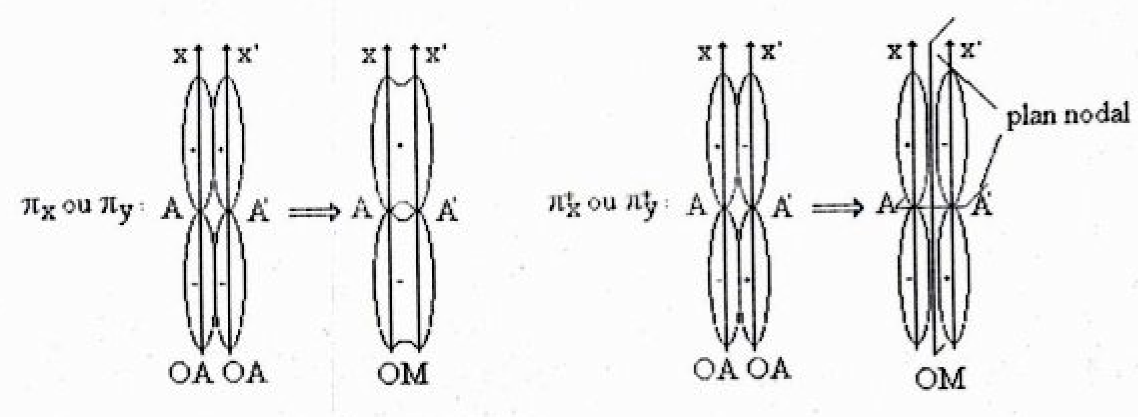
Les OA ($2p_x$ et $2p_{x'}$) ont des axes de symétrie parallèles, elles peuvent se recouvrirent latéralement pour donner naissance à 2 OM de type π :

$\pi_x = (1/2)^{1/2}(2p_x+2p_{x'})$ liante et $\pi_x^* = (1/2)^{1/2}(2p_x-2p_{x'})$ antiliante.

Ce recouvrement est peu important, par conséquent il conduit à une liaison relativement faible. Cette liaison est dénommée π car elle est antisymétrique dans la révolution autour de l'axe AA'(càd change de signe par rotation de 180° autour de AA').

Les OA ($2p_y$ et $2p_{y'}$) conduisent également à 2 OM :

$\pi_y = (1/2)^{1/2}(2p_y+2p_{y'})$ liante et $\pi_y^* = (1/2)^{1/2}(2p_y-2p_{y'})$ antiliante.



d-Structure électronique des molécules :

A partir de 8 OA on obtient 8 OM. 2 types de structures électroniques peuvent avoir lieu :

- lorsque la différence entre l'énergie des OM 2s et 2p est importante, l'interaction s-p est négligeable, la succession des OM est la suivante : $\sigma_{2s})<(\sigma_{2s}^*)<(\sigma_z)<(\pi_x,\pi_y)<(\pi_x^*,\pi_y^*)<(\sigma_z^*)$.

- Quand il y a interaction, on a l'ordre suivant : $(\sigma_{2s})<(\sigma_{2s}^*)<(\pi_x,\pi_y)<(\sigma_z)<(\pi_x^*,\pi_y^*)<(\sigma_z^*)$.

Les OM π_x et π_y d'une part et π_x^* et π_y^* d'autre part ont la même énergie.

e- Exemples de molécules A_2 :

F_2 :

-F(z=9) : $1s^2 2s^2 2p^5$

-seules les OA de valence ($2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$) entrent dans la formation de la liaison chimique.

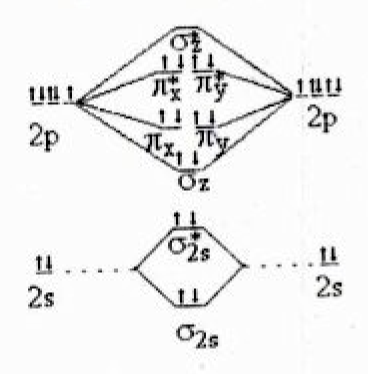
On a donc 2x7=14 électrons à caser dans les OM.

-la structure électronique : $(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_z)^2(\pi_x,\pi_y)^4(\pi_x^*,\pi_y^*)^4$.

-le nombre de liaison : i=1/2(8-6)=1.

-diagramme de Lewis : F—F

-Diagramme énergétique :



O_2 :

-O(z=8) : $1s^2 2s^2 2p^4$

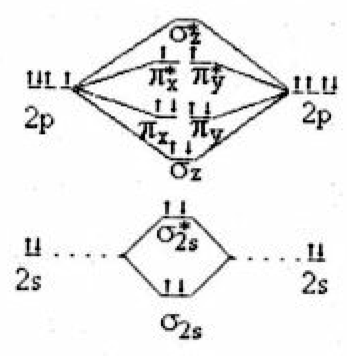
-les OA de valence $2s^2 2p^4$, donc 2x6=12 électrons à caser dans les OM.

-la structure électronique : $(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_z)^2(\pi_x,\pi_y)^4(\pi_x^*,\pi_y^*)^2$.

-le nombre de liaison : i=1/2(8-4)=2.

-diagramme de Lewis : O==O (le modèle de Lewis n'explique pas le paramagnétisme de la molécule d'O_2, mais la présence de 2 électrons célibataires sur (π_x*^1,π_y*^1) montre bien cette propriété).

-Diagramme énergétique :



N₂ :

Dans ce cas la différence d'énergie entre les niveaux 2s et 2p est faible, il y a donc une interaction s-p, par conséquent σ_z devient moins stable que (π_x,π_y).

-N(z=7) : $1s^2 2s^2 2p^3$

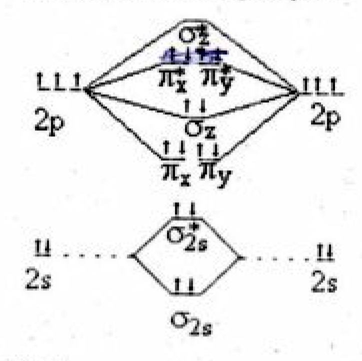
-les OA de valence $2s^2 2p^3$, donc 2x5=10 électrons à caser dans les OM.

-la structure électronique : $(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}*)^2(\pi_x,\pi_y)^4(\sigma_z)^2$.

-le nombre de liaison : i=1/2(8-2)=3.

-diagramme de Lewis : N==N

-Diagramme énergétique :



Ne_2 :

Dans ce cas i=0 donc cette molécule n'existe pas.

II-3-Molécules diatomiques heteronucléaires : Type AB

Dans le cas d'une molécule homonucléaire (A2), la répartition des électrons de liaison est symétrique par rapport à l'axe internucléaire A-A et au plan médiateur de cet axe. La liaison est purement covalente. Elle est dite apolaire(non polaire). En revanche, dans une molécule heteronucléaire AB, la différence d'EN entre A et B entraîne une densité électronique plus

importante sur l'atome le plus électronégatif. La répartition des électrons de liaison est dissymétrique, la liaison est dite polarisée.

II-3-1-Moment dipolaire

La molécule AB($\chi_B >> \chi_A$) est polaire, elle est caractérisée par un moment dipolaire permanent : $\vec{\mu}=q\vec{AB}$. $q=\delta e$; $0<\delta<1$ (δ : charge partielle) ; $l=|\vec{AB}|$

A B
+q $\vec{\mu}$ -q

$\mu=ql$ en Cm ou en Debye(D).

Le Debye est définie de telle façon que le moment dipolaire de 2 charges +e et –e séparées par un 1A est $\mu=4,8D$.

$\mu=el=1,6.10^{-19}.10^{-10}Cm=4,8D \Rightarrow 1D=(1,6/4,8).10^{-29}Cm=(1/3).10^{-29}$ Cm.

Dans le cas d'une molécule AB : $\mu=ql=\delta el=\delta l.1,6.10^{-29}Cm=4,8\delta lD$. l en A.

<u>Exemple</u> : HF : $\mu=1,83D$, $l=0,92A$; calculer δ ?

On sait que $\chi_H=2.3$ et $\chi_F=4$ alors HF est polaire : $H^{\delta+}$--------$F^{\delta-}$

$\delta=\mu/4,8.l=1,83/4,8.0,92=0,41$.

II-3-2-La liaison ionique

La liaison ionique est le cas extrême de la liaison covalente. Ce type de liaison est rencontré dans les molécules formées d'atomes d'électronégativités très différentes.

$A\cdot + \cdot B \longrightarrow A^{+} \; B^{-}$ ($\chi_B >> \chi_A$)

Il y a transfert d'un électron de A vers B.

II-3-3-Caractère ionique partiel d'une liaison.

Le moment dipolaire des molécules peut être mesuré expérimentalement, ses valeurs permettent de définir le caractère ionique partiel d'une liaison. En effet, selon l'état réel d'une liaison, il existe 3 types de situations :

A—B : aucun transfert, forme purement covalente. $\mu_{Cov}=0$.

A^+—B^- : transfert total, forme purement ionique, $\mu_{ion}=4,8l$.

$A^{\delta+}$—$B^{\delta-}$: transfert partiel, forme réelle, $\mu_{exp}=4,8\delta l$.

l est la distance de liaison.

Le pourcentage de caractère ionique est défini selon Pauling par : %ionique=(μ_{exp}/μ_{ion}).100

%ionique=(4,8δl/4,8l).100=δ.100.

<u>Exemple</u> : HF : $\mu_{exp}=1,83D$, $l=0,92A$; $\mu_{ion}=4,8l=4,8.0,92=4,42D$

%ionique=(1,83/4,42).100=41%.

On peut écrire HF, comme : $H^{+0,41}$--------$F^{-0,41}$.



II-3-4-Diagramme énergétique d'une molécule AB.

Dans le cas des molécules AB, le recouvrement est axial. Il ne peut s'effectuer que selon la symétrie de révolution autour de l'axe internucléaire et entre les OA d'énergies voisines.

Exemple : la molécule HF.

Seules les OA : F_{2s} et H_{1s} ou F_{2pz} et H_{1s} qui peuvent se recouvrirent (en tenant compte de leur symétrie).

L'énergie de ces OA est : H_{1s} : -13,6eV ;

F_{1s} : -686eV ; F_{2s} : -40,2eV et F_{2pz} : -18,6eV.

Quand on examine leur énergie, on constate qu'il ne peut y avoir de combinaison qu'entre F_{2pz} et H_{1s}, ce qui donne naissance à 2 OM, σ_z liante et σ_z*antiliante.

$\sigma_z = c_1 H_{1s} + c_2 F_{2pz}$ et $\sigma_z^* = c_3 H_{1s} - c_4 F_{2pz}$

$c_1 \neq c_2 \neq c_3 \neq c_4$ $c_2 > c_1$ car F est plus électronégatif que H.

Les OA 2s, $2p_x$ et $2p_y$ non utilisées donnent des OM de même énergie que ces OA. On les appelle OM non liantes. Elles restent localisées sur F(doublets libres).

1/2(n-n*)

OA H | OM HF | OA F

σ_z^*

1s | $2p_x$ $2p_y$ | 2p

σ_z

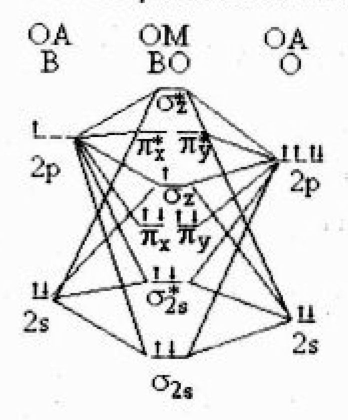
2s 2s

-la structure électronique : $(2s)^2(\sigma_z)^2(2p_x,2p_y)^4$.

-le nombre de liaison : i=1/2(2-0)=1.

-diagramme de Lewis : H--F

Dans ce type de molécules, il y a souvent interaction s-p du faite de l'énergies voisines de ces OA. Ce qui conduit à un diagramme tel que celui de la molécule BO suivant:



$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_x,\pi_y)^4(\sigma_z)^2$. i=1. Paramagnétique.

i=0 = Diamagnétique


ETUSUP.com